

Previsão Numérica do Impacto de uma Gota Viscoelástica numa Superfície Rígida por um Modelo Algébrico PTT

Daiane Iglesias Dolci*

Pós Graduação em Matemática Aplicada e Computacional, FCT/UNESP
19060-900 , Presidente Prudente, SP
E-mail: daia.dolci@gmail.com,

Gilcilene Sanchez de Paulo

Depto de Matemática e Computação, FCT/UNESP
19060-900 , Presidente Prudente, SP
E-mail: gilcilene@fct.unesp.br.

Resumo: Neste trabalho será apresentada uma aplicação do modelo algébrico PTT no problema de uma gota viscoelástica incidindo numa superfície rígida (*impacting drop*). A implementação e obtenção dos resultados numéricos foram feitos em uma plataforma de programação de alto desempenho denominada FREFLOW-2D. A formulação do modelo algébrico é exposta, destacando-se os principais conceitos para sua obtenção. A metodologia empregada para resolver o modelo algébrico PTT é baseada no método GENSMAC estendido para escoamentos viscoelásticos utilizando a discretização por diferenças finitas em uma malha deslocada. A verificação dessa metodologia é feita na simulação de um escoamento totalmente desenvolvido em um canal, comparando os resultados da solução numérica com a solução analítica. Como aplicação de escoamentos com superfície livre, o modelo algébrico foi testado na simulação de uma gota viscoelástica em uma placa rígida. Os resultados numéricos foram comparados com os previstos pelo modelo diferencial PTT, apresentando uma boa concordância.

Palavras-chave: Equação constitutiva PTT, modelo algébrico, *impacting drop*.

1 Introdução

O desenvolvimento de técnicas numéricas para obtenção de solução das equações de Navier-Stokes para escoamentos viscoelásticos transientes, incompressíveis, isotérmicos, com superfícies livres tem sido uma área de grande interesse por muitos pesquisadores. Adicionalmente, o desenvolvimento de técnicas numéricas mais eficientes, computadores com maior capacidade de cálculos e essencialmente o desenvolvimento de equações constitutivas mais elaboradas, capazes de prever um número maior de efeitos viscoelásticos, tem contribuído para o crescimento das pesquisas na área de simulação numérica de escoamentos viscoelásticos com superfícies livres.

A formulação do modelo algébrico para o tensor extra-tensão \mathbf{T} foi obtida originalmente a partir da equação constitutiva Oldroyd-B por Mompean et al.[2]. Em seguida, no trabalho [3] formulou-se um modelo algébrico a partir da equação constitutiva não-linear PTT. A não linearidade do modelo PTT modificou levemente a formulação original, essencialmente considerase $f(I_{\mathbf{T}})$ na equação (8). No caso bidimensional, o modelo algébrico consiste em resolver apenas uma equação diferencial, ao contrário do modelo diferencial que requer o cálculo de três equações diferenciais.

*Bolsista de mestrado FAPESP.

2 Equações Básicas

As equações básicas que descrevem escoamentos viscoelásticos, isotérmicos e incompressíveis são as equações da continuidade, da quantidade de movimento e para modelar a viscoelasticidade a equação constitutiva PTT, que na forma adimensionalizada são dadas, respectivamente, por

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (1)$$

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{u}) = -\nabla p + \frac{\beta}{Re} \nabla^2 \mathbf{u} + \nabla \cdot \mathbf{T} + \frac{1}{Fr^2} \mathbf{g}, \quad (2)$$

$$\left(1 + \epsilon \frac{Re W_i}{(1 - \beta)} I_{\mathbf{T}}\right) \mathbf{T} + W_i \left(\frac{D\mathbf{T}}{Dt} - \mathbf{T} \cdot \nabla \mathbf{u} - \nabla \mathbf{u}^t \cdot \mathbf{T}\right) = 2 \frac{(1 - \beta)}{Re} \mathbf{S}, \quad (3)$$

onde \mathbf{u} é o vetor velocidade, p é a pressão, \mathbf{T} é o tensor extra-tensão de contribuição polimérica, $I_{\mathbf{T}} = T^{xx} + T^{yy}$ é a notação designada para o traço de \mathbf{T} , t é a variável temporal, D/Dt é a derivada material e $\mathbf{S} = \frac{1}{2}(\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^t)$ é o tensor taxa de deformação.

Os números adimensionais $Re = \frac{\rho U L}{\eta_0}$, $W_i = \frac{\lambda U}{L}$ e $Fr = \frac{U^2}{g L}$ são os números de Reynolds, Weissenberg e Froude, respectivamente. As constantes L , U , ρ , g e λ são os valores de referência do comprimento, velocidade, densidade, campo gravitacional e do tempo de relaxação do fluido viscoelástico, respectivamente. A constante $\beta = \frac{\eta_s}{\eta_0}$ controla a contribuição do solvente Newtoniano, onde $\eta_0 = \eta_s + \eta_p$ viscosidade total do fluido à taxa nula de cisalhamento, η_s é a viscosidade do solvente e η_p é a viscosidade do polímero. O parâmetro ϵ está relacionado com o comportamento elongacional do modelo.

A seguir é apresentado sucintamente o desenvolvimento do modelo algébrico PTT a partir da equação (3), como proposto em [3].

3 Formulação do Modelo Algébrico PTT

Considere o tensor deviatórico, definido por

$$\mathbf{\Gamma} = \mathbf{T} - \frac{I_{\mathbf{T}}}{3} \mathbf{I}, \quad (4)$$

onde esse tensor pode ser representado por um polinômio em função dos tensores taxa de deformação \mathbf{S} e taxa de rotação $\mathbf{W} = \frac{1}{2}(\nabla \mathbf{u} - (\nabla \mathbf{u})^t)$ (ver [5]), dado por

$$\mathbf{\Gamma} = \frac{\{\mathbf{\Gamma S}\}}{\{\mathbf{S}^2\}} \mathbf{S} + \frac{\{\mathbf{\Gamma W S}\}}{\{\mathbf{S}^2\} \{\mathbf{W}^2\}} (\mathbf{S W} - \mathbf{W S}) + \frac{6 \{\mathbf{\Gamma S}^2\}}{\{\mathbf{S}^2\}^2} \left(\mathbf{S}^2 - \frac{1}{3} \{\mathbf{S}^2\} \mathbf{I} \right), \quad (5)$$

considerando escoamentos bidimensionais. Os escalares $\{\mathbf{\Gamma S}\}$, $\{\mathbf{\Gamma W S}\}$, $\{\mathbf{S}^2\}$, $\{\mathbf{W}^2\}$ e $\{\mathbf{\Gamma S}^2\}$ são os traços dos tensores $\mathbf{\Gamma S}$, $\mathbf{\Gamma W S}$, \mathbf{S}^2 , \mathbf{W}^2 e $\mathbf{\Gamma S}^2$, respectivamente.

Os valores $\{\mathbf{\Gamma S}\}$, $\{\mathbf{\Gamma W S}\}$ e $\{\mathbf{\Gamma S}^2\}$ podem ser calculados de maneira que a equação (5) torne-se explícita em $\mathbf{\Gamma}$. Para o cálculo desses escalares, trabalha-se primeiramente com a equação (3), reescrita em termos dos tensores \mathbf{S} e \mathbf{W} ,

$$\frac{D\mathbf{T}}{Dt} = -\frac{f(I_{\mathbf{T}})}{W_i} \mathbf{T} + 2 \frac{(1 - \beta)}{W_i Re} \mathbf{S} + (\mathbf{S T} + \mathbf{T S}) - (\mathbf{T W} - \mathbf{W T}). \quad (6)$$

Substituindo (4) em (6), tem-se

$$\frac{D\mathbf{\Gamma}}{Dt} = -\frac{f(I_{\mathbf{T}})}{W_i} \mathbf{\Gamma} - \frac{f(I_{\mathbf{T}})}{W_i} \frac{I_{\mathbf{T}}}{3} \mathbf{I} + 2 \frac{(1 - \beta)}{Re W_i} \mathbf{S} + (\mathbf{S \Gamma} + \mathbf{\Gamma S}) - (\mathbf{\Gamma W} - \mathbf{W \Gamma}) + \frac{2}{3} \mathbf{S I}_{\mathbf{T}} + \frac{D I_{\mathbf{T}}}{Dt} \frac{1}{3} \mathbf{I}. \quad (7)$$

Note que a equação (7) depende de $I_{\mathbf{T}}$, o qual pode ser obtido tomando-se o traço da equação (6). Assim, a equação de evolução do traço é dada por,

$$\frac{D I_{\mathbf{T}}}{Dt} = -\frac{f(I_{\mathbf{T}})}{W_i} I_{\mathbf{T}} + 2 \{\mathbf{\Gamma S}\}. \quad (8)$$

Substituindo (8) em (7), tem-se

$$\frac{D\mathbf{\Gamma}}{Dt} = -\frac{f(I_{\mathbf{T}})}{W_i} \mathbf{\Gamma} + \left(\mathbf{S}\mathbf{\Gamma} + \mathbf{\Gamma}\mathbf{S} - \frac{2}{3} \{\mathbf{\Gamma}\mathbf{S}\} \right) - (\mathbf{\Gamma}\mathbf{W} - \mathbf{W}\mathbf{\Gamma}) + 2 \left(\frac{(1-\beta)}{W_i Re} + \frac{1}{3} I_{\mathbf{T}} \right) \mathbf{S}. \quad (9)$$

Para chegar ao modelo algébrico, duas hipóteses de pequena variação para o tensor deviatório $\mathbf{\Gamma}$ das componentes do tensor extra-tensão foram estudadas por Mompean e co-autores no trabalho [2]. Apenas uma delas garante uma modelagem consistente, essa hipótese assume

$$\frac{D\mathbf{\Gamma}}{Dt} = \frac{\mathbf{\Gamma}}{I_{\mathbf{T}}} \frac{DI_{\mathbf{T}}}{Dt}.$$

Desta forma, a equação (9) pode ser reescrita como,

$$0 = -\frac{\mathbf{\Gamma}}{I_{\mathbf{T}}} 2 \{\mathbf{\Gamma}\mathbf{S}\} + \left(\mathbf{S}\mathbf{\Gamma} + \mathbf{\Gamma}\mathbf{S} - \frac{2}{3} \{\mathbf{\Gamma}\mathbf{S}\} \right) - (\mathbf{\Gamma}\mathbf{W} - \mathbf{W}\mathbf{\Gamma}) + 2 \left(\frac{(1-\beta)}{W_i Re} + \frac{1}{3} I_{\mathbf{T}} \right) \mathbf{S}. \quad (10)$$

A partir da equação (10) obtém-se os valores $\{\mathbf{\Gamma}\mathbf{S}\}$, $\{\mathbf{\Gamma}\mathbf{W}\mathbf{S}\}$ e $\{\mathbf{\Gamma}\mathbf{S}^2\}$ da seguinte forma: para determinar $\{\mathbf{\Gamma}\mathbf{W}\mathbf{S}\}$ e $\{\mathbf{\Gamma}\mathbf{S}^2\}$, multiplica-se a equação (10) por $\mathbf{W}\mathbf{S}$ e \mathbf{S}^2 , respectivamente, a seguir toma-se o traço, obtendo

$$\{\mathbf{\Gamma}\mathbf{S}^2\} = -\frac{I_{\mathbf{T}}}{6} \{\mathbf{S}^2\} \quad \text{e} \quad \{\mathbf{\Gamma}\mathbf{W}\mathbf{S}\} = -\frac{I_{\mathbf{T}}}{2} \{\mathbf{W}^2\};$$

Para determinar $\{\mathbf{\Gamma}\mathbf{S}\}$ basta multiplicar a equação (10) por \mathbf{S} e tomar o traço, obtendo

$$\{\mathbf{\Gamma}\mathbf{S}\} = +\sqrt{\frac{I_{\mathbf{T}}^2}{2} \{\mathbf{W}^2\} + \left(\frac{(1-\beta)}{W_i Re} + \frac{1}{2} I_{\mathbf{T}} \right) I_{\mathbf{T}} \{\mathbf{S}^2\}}. \quad (11)$$

Desta forma, a equação (5) pode ser reescrita por

$$\mathbf{\Gamma} = \frac{1}{\{\mathbf{S}^2\}} \{\mathbf{\Gamma}\mathbf{S}\} \mathbf{S} - \frac{1}{2} \frac{I_{\mathbf{T}}}{\{\mathbf{S}^2\}} \left[(\mathbf{S}\mathbf{W} - \mathbf{W}\mathbf{S}) - 2 \left(\mathbf{S}^2 - \frac{1}{3} \{\mathbf{S}^2\} \mathbf{I} \right) \right]. \quad (12)$$

Portanto, o modelo algébrico consiste em calcular a equação diferencial para o traço $I_{\mathbf{T}}$ dada por (8), resolver a equação algébrica (12) para $\mathbf{\Gamma}$ e por fim resolver a equação (4) para obtermos o tensor extra-tensão \mathbf{T} .

4 Metodologia Numérica

As equações do modelo algébrico PTT foram implementadas na plataforma FREEFLOW-2D, cuja metodologia utilizada é uma extensão da metodologia GENSMAC (GENERALIZED SIMPLIFIED MARKER-AND-CELL) para fluidos viscoelásticos, que resolve as equações governantes por técnicas de diferenças finitas numa malha deslocada aplicando a estratégia Oishi et. al [4], a qual combina o método da projeção com uma técnica implícita para o tratamento da pressão em superfícies livres.

Na integração temporal da equação de quantidade de movimento foi empregado o método de Euler implícito enquanto na equação de evolução para o $I_{\mathbf{T}}$ foi empregado o método de Runge-Kutta de 2ª ordem. Os termos convectivos foram aproximados pelo método ‘upwind’ de alta ordem CUBISTA e as derivadas espaciais por diferenças centrais.

4.1 Verificação da Metodologia Numérica

A verificação da metodologia numérica é feita pela simulação do escoamento totalmente desenvolvido em um canal comparando os resultados numéricos com a solução analítica do problema, nesta simulação considera-se as condições iniciais $\mathbf{u}(x, y, t_0) = \mathbf{0}$, $p(x, y, t_0) = 0$, $\mathbf{T}(x, y, t_0) = \mathbf{0}$, $I_{\mathbf{T}}(x, y, t_0) = 1.0 \times 10^{-12}$. Na entrada do canal foram impostas as soluções analíticas para a componente de velocidade $u(y)$ e o tensor extra-tensão \mathbf{T} , [1]. Em contornos rígidos foi aplicada a condição de não-escorregamento para o vetor velocidade ($\mathbf{u} = \mathbf{0}$), $I_{\mathbf{T}}$ e \mathbf{T} são calculados, respectivamente, a partir da equação (8) e da equação (4) considerando as simplificações cabíveis com relação as condições da velocidade na geometria em questão. Na saída do canal adotada-se a condição homogênea de Neumann para a velocidade \mathbf{u} e o traço de \mathbf{T} , isto é,

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial n} = 0, \quad \frac{\partial \mathbf{T}}{\partial n} = 0 \quad \text{e} \quad \frac{\partial I_{\mathbf{T}}}{\partial n} = 0.$$

A simulação do escoamento entre duas placas paralelas, cuja distância entre as placas é $L = 1m$ e comprimento $10L$, foi feita considerando os números adimensionais $Re = 0.5$, $W_i = 0.2$, $\beta = 0.6$ e o parâmetro $\epsilon = 0.5$. A velocidade média do escoamento é de $U = 1.0ms^{-1}$.

As malhas espaciais utilizadas para essa verificação são Malha Grossa (M1): 10×100 células ($\delta x = \delta y = 0.1$), Malha intermediária (M2): 20×200 células ($\delta x = \delta y = 0.05$) e Malha fina (M3): 40×400 células ($\delta x = \delta y = 0.025$).

As Figuras 1(a)-1(c) descrevem respectivamente os perfis das componentes do tensor extra-tensão T^{xy} , T^{xx} e da componente de velocidade u na direção- x .

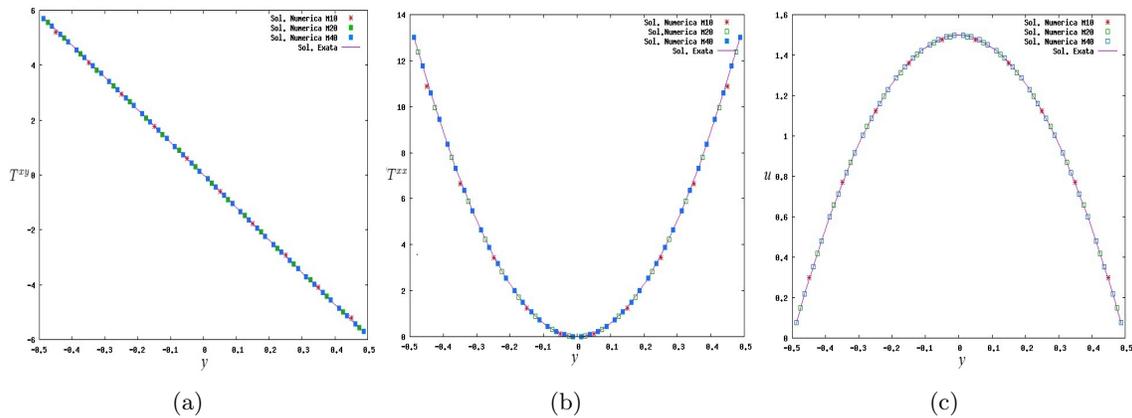


Figura 1: Comparação da solução numérica com a solução analítica da componente T^{xx} (a), componente T^{xy} (b) e da velocidade u (c), em $x = 5L$ e $t = 50s$.

A análise da convergência do método numérico foi feita através do cálculo dos erros relativos entre a solução numérica e a solução exata. O erro relativo foi calculado na norma L_1 , definida por:

$$E(SolNum) = \frac{\sum |SolEx - SolNum|}{\sum |SolEx|}. \tag{13}$$

No cálculo da ordem de convergência é utilizada a seguinte expressão:

$$O = \frac{\log\left(\frac{E_M}{E_{\frac{M}{2}}}\right)}{\log 2} \tag{14}$$

onde M é uma determinada malha espacial com espaçamento δx e $M/2$ a malha espacial com espaçamento $\delta x/2$.

A Tabela 1 apresenta os valores do erro relativo calculado pela equação (13) e as Tabelas 2 e 3 apresentam a ordem de convergência do método numérico utilizando as malhas M1, M2 e M3.

Tabela 1: Erros entre a solução analítica e a solução numérica.

Erro	M1	M2	M3
$E(u(y))$	6.02×10^{-3}	1.59×10^{-3}	4.08×10^{-4}
$E(T^{xx})$	1.75×10^{-2}	4.50×10^{-3}	1.14×10^{-3}
$E(T^{xy})$	8.08×10^{-3}	2.09×10^{-3}	5.30×10^{-4}

Tabela 2: Ordem de convergência do modelo algébrico PTT usando as malhas M1, M2 e M3.

Variáveis	$O = \log \left(\frac{E_{M1}}{E_{M2}} \right) / \log 2$	$O = \log \left(\frac{E_{M2}}{E_{M3}} \right) / \log 2$
$u(y)$	1.91	1.97
T^{xx}	1.96	1.98
T^{xy}	1.94	1.98

5 Impacto de uma Gota numa Superfície Rígida

Na simulação da gota, as condições iniciais e a condição de contorno na fronteira rígida são as mesmas que foram consideradas na simulação do escoamento entre duas placas paralelas. As condições de contorno na superfície livre são dadas por

$$\mathbf{m}^t \cdot (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}) = 0, \quad \mathbf{n}^t \cdot (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}) = 0 \tag{15}$$

e $\frac{\partial I_T}{\partial \mathbf{n}} = 0$, onde $\boldsymbol{\sigma} = 2\mu\mathbf{S} - p\mathbf{I}$ e \vec{n} é a direção normal a superfície livre.

O problema da gota foi simulado em um domínio computacional $0.056m \times 0.053m$ (156×153 células) considerando o diâmetro de $L = 0.02m$, a velocidade inicial é $v_0 = -1.0m/s$, a velocidade de escala é $U = 1.0m/s$. As constantes adimensionais consideradas são $Re = 5.0$, $Wi = 1.0$, $Fr = 2.26$, $\beta = 0.6$ e o parâmetro $\epsilon = 0.1$.

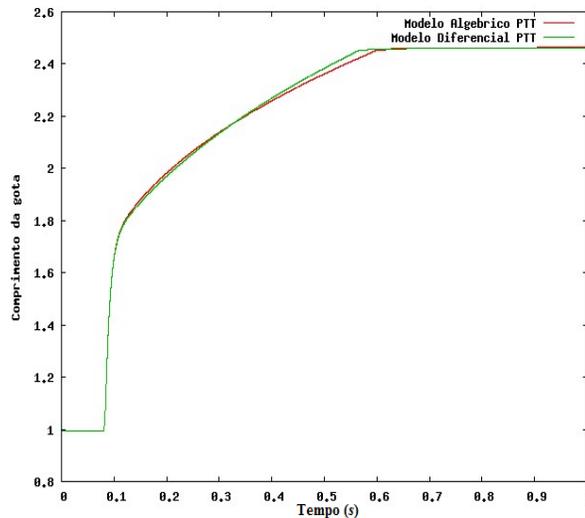


Figura 2: Comparação dos resultados numéricos do modelo algébrico com o modelo diferencial PTT considerando a evolução do comprimento da gota incidindo numa superfície rígida.

Note, pela Figura 2 que a variação do comprimento da gota com relação ao tempo do modelo algébrico, corresponde ao modelo diferencial PTT. Também é possível observar pela Figura 3 que o campo de velocidade v apresenta um comportamento análogo nos modelos diferencial e algébrico PTT.

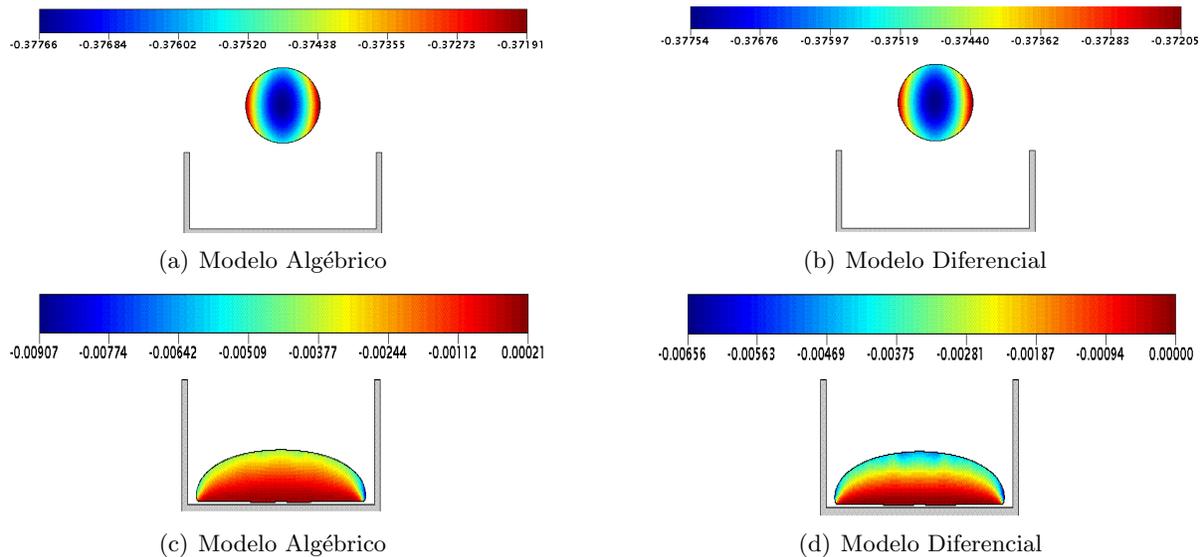


Figura 3: Visualização bidimensional da componente de velocidade v usando o modelo diferencial PTT e modelo algébrico PTT nos tempos $t = 0.04s$ em (a) e (b) e $t = 0.4s$ em (c) e (d).

6 Conclusão

Neste trabalho foi apresentada sucintamente a formulação do modelo algébrico PTT a partir da equação constitutiva diferencial, a metodologia numérica e a verificação da mesma comparando a solução numérica do escoamento entre duas placas paralelas com a solução analítica. Nos gráficos 1(a), 1(b) e 1(c) verificou-se que a solução numérica da velocidade u e das componentes T^{xy} e T^{xx} apresentam uma boa concordância com a solução exata do problema, além disso, nota-se pela Tabela 1 que o erro relativo tende a zero à medida que há um refinamento de malha, mostrando uma convergência da solução numérica, onde essa convergência é de ordem aproximadamente dois como mostrado na Tabela 2. Em seguida foram apresentados os resultados da simulação do problema da gota usando o modelo algébrico e o modelo diferencial PTT. Neste caso, o modelo algébrico capturou o mesmo fenômeno previsto no modelo diferencial.

Referências

- [1] D. O. A. Cruz and F. T. Pinho, *Analytical solutions for fully developed laminar flow of some viscoelastic liquids with a newtonian solvent contribution*, Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics 132 (2005), 28-35.
- [2] G. Mompean, T. Jongen, T.B. Gatski, and M. Deville, *On algebraic extra-stress models for the simulation of viscoelastic flows*, Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics 79 (1998), 261-281.
- [3] G. Mompean (2002). *On predicting abrupt contraction flows with differential and algebraic viscoelastic models*, Computers and Fluids 31, 935-956.
- [4] Oishi C. M., Martins F.P., Tomé M.F., Alves M.A. (2011). *Numerical simulation of the eXtended PomPom model for viscoelastic free surface flows*, Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics 166, 165-179.
- [5] Pope S. B. (1975). *A more general effective-viscosity hypothesis*. Journal Fluid Mech 72, 331-340.